ODLROについてのノート

京大理　　恒藤敏彦

（2月17日受理）

§1. まえがき

液体 H_e II のような超流動状態は，off diagonal long range order（ODLRO）によって特徴づけられる。いま，たとえば「H_e^4 の固体ではODLROがあるか？」と問えば，みな即座に「ない」と答えるにちがいない。最初にODLROを詳しく議論したOnsager－Penroseの論文[1]にも，結晶になればODLROはなくなると簡単にかたづけられている。しかし，「ない」という証明もない。ここではこの問題の一面について議論してみよう。役に立たない話ではあるが，結晶統計にも少し関係のある初歩的な話としてあるいは興味をもたれる人もあるかもしれない。

§2. 問　題

話を簡単にするためにT＝0のBose系を考える。H_e^4 の液体状態などを近似的に扱うのに

$$\Psi(x_1 \cdots x_N) = \prod_{i<j} f(x_i - x_j) \tag{1}$$

のような型の波動関数が使われるが，[2] 適当な f をとったとき，この Ψ で表わされる状態ではODLROがあると思われている。[3] 固体では各粒子が格子点の近くに局在するようになるであろう。したがって上に対応するものとして

$$\Psi(x_1 \cdots x_N) = \sum_{\{\alpha_i\}} \prod_{i=1}^{N} \phi_{\alpha_i}(x_i) \prod_{i<j} f(x_i - x_j) \tag{2}$$

が考えられる。[4] ここで $\phi_i(x) = \phi(x-R_i)$ は i 番目の格子点 R_i 近くに局在した1粒子の波動関数を表わし，和は1，…，N の permutation $\alpha_1, \cdots, \alpha_N$ について行なう。しかしこれについてODLROを議論するのは困難なので，$\Pi f(x_i - x_j)$ の部分はODLROのあるなしには本質的でないとし，Hartree

型の

$$\Psi(x_1, \cdots, x_N) = \sum_{\{\alpha\}} \prod_i^N \phi_{\alpha_i}(x_i) \tag{3}$$

についてまず議論する。もし (3) で ODLRO がなければ，当然 (2) でもない。

Bose 系の基底状態だから，ϕ は real で positive definite と考えてよい。また

$$\int \phi_i^2(x)\, dx = 1 \tag{4}$$

とし，異った site 間の overlap は

$$a_{ij} = \int \phi_i(x)\, \phi_j(x)\, dx \tag{5}$$

とする。よく知られているように，ODLRO のあるなしは，

$$\phi(x, x') \equiv \frac{N \int \Psi(x, x_2 \cdots x_N)\, \Psi(x_1' \, x_2 \cdots x_N)\, d^{N-1}x}{\int \Psi^2(x_1 \cdots x_N)\, d^N x} \tag{6}$$

としたとき

$$\lim_{|x-x'| \to \infty} \phi(x, x') \to 1 \ (\text{の程度}), \tag{7}$$

あるいは $\to 0$,

で特徴づけられる。あるいは $N \to \infty$ のとき

$$\Lambda \equiv \frac{1}{N^2 v} \int dx \int dx' \phi(x, x') \to 1, \tag{8}$$

あるいは $\to 0$,

とも表わされる。V は unit cell の体積。a_{ij} で書くと (6) の分母は $N!\, P(a_{ij})$ となる。ただし

$$P(a_{ij}) \equiv \sum_{\{\alpha\}} a_{1\alpha_1} \cdots a_{N\alpha_N} \tag{9}$$

は a_{ij} の permanent である。同様に

$$\int dx\, dx'\, d^{N-1}x \sum_{\{\alpha\}} \phi_{\alpha_1}(x)\phi_{\alpha_2}(x_2) \cdots \phi_{\alpha_N}(x_N)$$

$$\times \sum_{\{\beta\}} \phi_{\beta_1}(x')\phi_{\beta_2}(x_2) \cdots \phi_{\beta_N}(x_N)$$

$$= (N-1)!\; c^2 \sum_{i,j=1}^{N} m_{ij}. \tag{10}$$

ここで，

$$c \equiv \int \phi(x)\, dx, \tag{11}$$

m_{ij} は P の $i-j$ 要素の minor である。したがって

$$\Lambda = \frac{c^2}{N^2 v} \frac{\sum_{i,j} m_{ij}}{P} \tag{12}$$

ここで２つの極端な場合を考える。

a)　$a_{ij} = \delta_{ij}$　(no overlap)

このとき

$$P = 1, \quad m_{ij} = \delta_{ij}, \quad c = \sqrt{v}$$

したがって $\Lambda = 1/N$，当然 ODLRO はない。

b)　$a_{ij} = 1$　$(\phi = \text{const})$

このときには

$$P = N!, \quad m_{ij} = (N-1)!, \quad c = \sqrt{Nv}$$

$$\therefore \quad \Lambda = 1$$

§3. Nearest−Neighbour Overlap

次にもっとも重要な Nearest−Neighbour 間の Overlap を考えた場合を

取扱う。つまり

$$a_{ij}=a,\quad i,j \text{ が nearest neighbour},$$
$$=0,\quad \text{その他の場合}$$

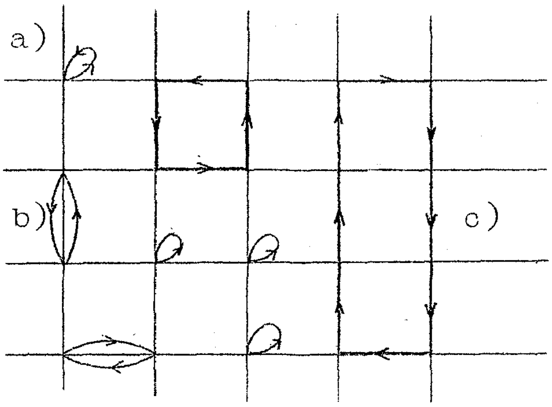
まず問題を格子上のグラフで表現する。

最初に Permanent P を求める。次の規則で作られる格子上のグラフの集合を考えよう。

i) 各 vertex には1つの outgoing および1つの incoming line が出入りする。

ii) 1つの line は，ある vertex をそれ自身に，あるいは nearest neighbour に結ぶことができる。

たとえば図のようなグラフになる。



明らかにこれは3つの形の subgraph からできている：

a) self—loop. これには weight 1 を与える。

b) n.n. 同志で閉じるもの。これには a^2 を与える。

c) polygon. これは右まわりと左まわりと区別される (oriented)。n辺の polygon には a^n を与える。

Pに対する1つのグラフの寄与は，そのなかの subgraph の weight の積であり，P はそれをあらゆる distinct graph について加えたものである。

m_{ij} に対しては，i th vertex および j th vertex にはそれぞれ outgoing および incoming line だけがあるとして，Pと同様にして求められる。要するに i と j を self—avoinding walk で結び，残りの vertices は P の場合と同じ閉じた subgraphs でおおえばよい。

いまの場合，(12) のかわりに

$$\lambda \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{c^2}{Nv} \sum_j \frac{m_{ij}}{P} \begin{array}{l}\to 1 \\ \text{or}\to 0\end{array} \tag{13}$$

を用いよう。上の求め方にしたがって

$$\lambda = \lim_{N\to\infty} \frac{c^2}{Nv} \sum_j \sum_{s=0} a^s \sum_{\sigma_s(i\to j)} W[\sigma_s(i\to j)] / P, \tag{14}$$

と書く，ここで $\sigma_s(i\to j)$ は，s−step で i と j を結ぶ1つの self−avoiding walk を表わし，W は $\sigma_s(i\to j)$ を含むグラフの weight から a^s をとり出したものである。W は S が $i\to j$ の最小の step の数より小さいときは 0 とする。

λ の upper bound を求めよう，明らかに任意の σ に対して

$$W(\sigma) \leqq P \tag{15}$$

したがって

$$\lambda \leqq \lim_{N\to\infty} \frac{c^2}{Nv} \sum_j \sum_{s=0} C_s(i\to j)\, a^s \tag{16}$$

ここで $C_s(i\to j)$ は，$i\to j$ への s−step の self avoiding walk の数である。それは明らかに，すぐもとに帰らない random walk の場合の対応する数 C′よりも小さい。したがって

$$\lambda \leqq \lim_{N\to\infty} \frac{c^2}{Nv} \sum_s \sum_j C_s'(i\to j)\, a^s \tag{17}$$

それゆえ，もし $\sum_s$ の級数が収れんすれば λ は 0 となる。大きな s に対しては

$$\sum_j C_s'(i\to j) \to (d-1)^s \tag{18}$$

となる。ただし d は n. n. の数である，結局，もし

$$a < \frac{1}{d-1} \tag{19}$$

であれば，ODLRO はない。

ところが，φ が positive definite で規格化されていることと，n.n. overlap しかないことから Schwartz の不等式を使って，

$$a \leqq \frac{1}{d} \tag{20}$$

が証明される。したがって，n.n. overlap しかないときには，（3）の状態は ODLRO をもたないことが示された。

上の問題は明らかに Ising Model の場合と共通する性格をもっている。異なる点は，グラフの型がちがう（たとえば１つの vertex はｄ個の n.n. と結合することができる）のと，ａにあたる定数が tanh（J／kT）であり，1までの任意の価をとることである。

なお，（13）の λ が有限になるようなａがあるかどうかもわからない。

§4. おわりに

i）有限の range をもつ任意の overlap，すなわち $\ell / L \sim 0(N^{-\frac{1}{3}})$ である ℓ に対し，

$$a_{ij} = 0, \qquad |R_i - R_j| > \ell.$$

が与えられたとき，ODLRO はあるか？

Conjecture（E.H.Lieb による）は，No であるが，証明はされていない。

ii）以上扱った問題は，物理的にはほとんど意味がない。その理由は，（2）の形の波動関数自体がどれほど意味があるかわからないからである。むしろ固体でも（1）の形の方が現実に近いであろう。それに，（2）のようなやり方で対称化するかわりに，始めから１粒子の関数として

$$\psi(x) = \sum_i \phi_i(x)$$

という全体に拡がった関数をとって，

$$\Psi = \prod_i \psi(x_i) \prod_{i<j} f(x_i - x_j)$$

を作れば，この状態ではおそらく ODLRO があるだろう。いずれにせよ，固

体 H_e^4 では overlap はあったとしても，きわめて小さく，問題にならないと思われる。

終りに，この問題に興味をもち，貴重な討論をしてくれた Prof. E.H. Lied に感謝します。（12）の形にかくこと，（20）式などは彼の指摘によるものです。

文　献

1） O.Penrose & L.Onsager, Phys. Rev. 104, 576 (1956)

2） A.Bijl, Physica 7, 869 (1940),
R.Jastrow, Phys. Rev. 98, 1479 (1955)

3） W.L.McMillan, Phys. Rev. 138, A442 (1965)

4） L.H.Nosanow, Phys. Rev. 146, 120 (1966)